

目次

はじめに	1
組織とメンバー: 2024年度	2
先端エネルギー材料研究紹介	
・磁性ナノ構造体を基軸とした先端エネルギー材料研究	3
・先端エネルギー応用のためのナノ材料の理論的研究	4
・室温近傍で作動する水素貯蔵材料の開発	5
イベント	
E-IMR Summer Meeting 2024	6
お知らせ	
若手研究者のための革新的エネルギー材料・複合モジュール創製研究助成	6

はじめに

昨今のエネルギー問題と地球温暖化・気候変動問題は喫緊の課題であり、その解決策を科学技術の立場から取り組むことは、非常に重要です。2022年度から、E-IMRセンター第2期として、組織の拡充・強化を図り、太陽エネルギーの効率的利用と3つの「蓄」の最大化に貢献するための事業を展開しております。この目的のため、第1期のグループ編成(スピントロニクス、イオン、光、材料プロセスに関わるグループ編成)から、現在、革新的エネルギー材料と複合モジュール創製に向けた4つの研究ユニット体制、1. 太陽エネルギー変換材料研究ユニット、2. 蓄エネルギー材料研究ユニット、3. 材料評価解析研究ユニット、4. 複合モジュール・社会実装研究ユニットに再編し、また、本センターの方向性の基軸をグリーンエネルギーテクノロジーの開拓にシフトしました。

今年度から、新たに、スピントロニクスおよび磁性の分野から関剛斎教授および蓄水素の要として、佐藤豊人准教授にE-IMRのメンバーとして加わって頂くことになりました。お二人の略歴を簡単に紹介いたします。

関教授は、これまで一貫してスピントロニクス材料およびナノ磁性の研究に従事しており、新材料の開発や材料特性の改良によってデバイスの機能性向上や新機能の創出、さらに物理現象の解明に取り組んでいます。L1₀型FePt規則合金をはじめとして規則合金の特徴をスピントロニクスに活用する規則合金スピントロニクスに従事することから研究者キャリアをスタートさせ、その後は規則合金を基盤にしつつ様々な材料における電荷-スピン-熱の相

互変換現象へと研究を展開させてきました。エネルギー材料という観点では、強磁性体を介した電流-熱流変換の可視化や金属人工格子を用いた電流-熱流変換の高性能化などに成功しています。E-IMR発の成果としてスピントロニクス機能によるエネルギー変換材料や省エネルギーデバイスを実現できるよう、基礎および応用の両面から研究を推進しています。

また、佐藤准教授は、2001年にスウェーデン・ストックホルム大学(Department of Physical, Inorganic and Structural Chemistry)に留学し、Dag Noréus教授のもとで水素貯蔵を目指した水素化物の合成、及びX線・中性子回折による結晶構造解析の技術を学び、アルカリ土類金属を含む新規水素化物の結晶構造の解明で博士号を取得しました。専門は、水素貯蔵材料研究ですが、特にX線・中性子回折による新規水素化物の未知結晶構造の解明を得意とし、博士号取得後も原子配列の観点での水素貯蔵材料開発に従事しています。現在、JST革新的GX技術創出事業(GteX)・水素領域の革新水素貯蔵やノルウェー、インドとの国際共同研究プロジェクト(HyTack)に参画し、水素貯蔵材料、及びその関連材料研究を国内外の大学・研究機関と共に遂行しています。

以上のようにユニット編成やメンバー構成を新たにし、新たに参画頂いた先生方とも一丸となって、グリーンエネルギーテクノロジーに貢献すべく研鑽を積み、カーボンニュートラルに向けた太陽エネルギー利用グリーンエネルギー社会の構築に貢献していく所存です。

組織とメンバー:2024年度

体制図 (2024)



理学系研究部門出身



工学系研究部門出身

センター長

センター長/教授

市坪 哲

蓄電池創製
相変態構造制御
統計熱力学組織形成論



運営委員会

研究支援室

特任教授

佐藤敬浩

研究企画・運営担当



研究戦略室

太陽エネルギー変換材料研究ユニット

教授

藤原 航三

結晶成長
Si多結晶太陽電池



教授(兼)

関 剛斎

磁性薄膜・ナノ構造
スピントロニクス



教授(兼)

塚崎 敦

超伝導薄膜
界面物性
トポロジカル物性・物質



教授(兼)

Bauer, Gerrit
Ernst-Wilhelm

磁性理論物理
スピントロニクス
(材料科学高等研究所)



准教授(兼)

岡本 範彦

透過電子顕微鏡
熱電材料



助教(兼)

前田 健作

結晶成長
Si多結晶の成長メカニズム



助教(兼)

伊藤 啓太

強磁性氧化物
規則合金



特任助教

野澤 純

コロイド
結晶成長



蓄エネルギー変換材料研究ユニット

教授(兼)

宮坂 等

酸化還元活性固体格子
多機能型ソフトマテリアル
機能協調型二次電池



教授(兼)

折茂 慎一

高密度水素貯蔵材料
超イオン伝導材料
多価蓄電デバイス
(材料科学高等研究所)



教授(兼)

高村 仁

固体酸化燃料電池
プロトン伝導性セラミックス
水素製造システム
(工学研究科)



准教授(兼)

佐藤 豊人

水素貯蔵材料
水素関連材料



特任助教

李 弘毅

デュアルリチウム電池
金属・合金負極材料開発



材料評価・解析研究ユニット

教授(兼)

藤田 全基

量子ビーム
数相関電子系
結晶成長



教授(兼)

熊谷 悠

計算材料学
マテリアルズインフォマティクス
セラミックス



教授(兼)

高橋 幸生

放射光
コヒーレント回折イメージング
微細構造・化学状態解析
(国際放射光イノベーション・スマートセンター)



准教授

Belosludov,
Rodion V.

機能性ナノボラス材料
ガス貯蔵・分離



助教(兼)

河口 智也

Li/多価蓄電池正極材料
放射光X線散乱・分光解析



複合モジュール・社会実装研究ユニット

教授(兼)

加藤 秀実

ナノボラス金属・半金属
金属ガラス・アモルファス合金



教授/センター長

市坪 哲

蓄電池創製
相変態構造制御
統計熱力学組織形成論



特任助教

宋 瑞瑞

脱成分(デアロイング)
多孔質金属/合金
融媒



磁性ナノ構造体を基軸とした先端エネルギー材料研究

関 剛斎 教授
太陽エネルギー変換材料研究ユニット
磁性材料学研究部門

2024年度より、太陽エネルギー変換材料研究ユニットのメンバーとしてE-IMRセンターの研究に参画しています。

磁性材料研究部門は、薄膜成長の技術や電子線などを使った微細加工技術を駆使することで、様々な磁性材料をナノ構造化や複合化することを得意としています。ナノ構造化・複合化によって生まれる新たな機能性を追求することで、先端磁気デバイスに役立つ材料の創製とその基礎となる物理現象の解明に取り組んでいます。

磁性材料は、モータに用いられているマクロな永久磁石から、磁気ランダムアクセスメモリや磁気記録を構成するミクロなデバイスまで幅広く応用されています。現在我々が直面しているIoT/AI社会の課題やエネルギー・環境問題に対しても、磁性材料はキーマテリアルと位置付けられています。その中でも、スピン角運動量の流れであるスピン流を作り出したり検出したりできる材料は、電流-熱流-スピン流間の相互変換を可能にし、スピンカロリトロニクスに代表される新しい研究領域を切り拓いてきました。

スピンカロリトロニクスでは、スピン流と熱流の変換、あるいはスピンを介した電流と熱流の変換を研究の舞台として、機構の解明や

変換効率の向上を目指した研究課題が進められており、次世代のエネルギーハーベスティング技術としても期待されています。当該研究部門では、磁性体における横型の熱電変換現象である「異常ネルンスト効果」に着目しており、変換効率の指標となる異常ネルンスト係数が大きな材料の創製を推進しています。これまでに、異種金属を組み合わせた金属人工格子を作製し、多層化による異常ネルンスト係数の増大や、積層回数の増加に伴う熱伝導率の抑制と性能指数の向上などの成果を上げてきました。例えば、Ni層とPt層をナノメートルオーダーでエピタキシャル成長させたNi/Pt金属人工格子を作製することで、バルクNiよりも一桁大きな異常ネルンスト係数が得られることを明らかにしています(図1)。また、特異な電子構造を有するワイル半金属であるCo₂MnGaホイスラー合金を人工格子化することにも成功し、フレキシブル基板上においても高い熱電変換効率を実現してきました。今後は、さらなる変換効率の向上を目指してスピンカロリトロニクス材料の創製を推進することで、太陽エネルギー変換材料研究ユニットの一員としてエネルギー材料研究の発展に貢献していきます。

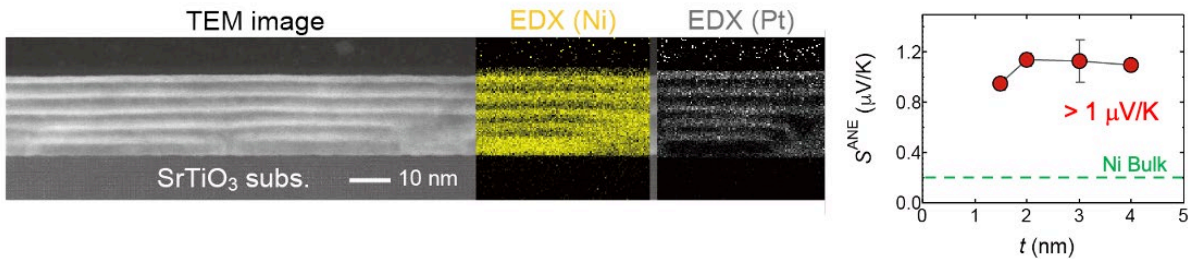


図1 大きな異常ネルンスト係数(S^{ANE})を示すNi/Pt金属人工格子の断面透過電子顕微鏡像、および S^{ANE} のNi層厚(t)依存性。

<参考> 関教授の研究詳細はホームページをご覧ください。
<https://magmatelab.imr.tohoku.ac.jp/index.html>

先端エネルギー応用のためのナノ材料の理論的研究

Belosludov, Rodion V 准教授
材料評価・解析研究ユニット
機能性ナノポーラス材料

私の研究活動は、各種実用目的に対して最適な材料を選択するための実験支援計算機予測を主としています。新組成と有用特性を有する材料を理論的に設計するためには、材料の原子スケールでの化学的および物理的特性を十分に理解していることが重要です。実験結果に対しては理論的解釈が必要なことが多く、計算能力が過去10年間で急速に成長したスパコンによるコンピュータシミュレーションは、現在、材料研究に不可欠な研究ツールとなっています。以下に最近の実績を述べます。

バレートロンクスは、半導体中の電子の谷の自由度を情報処理に利用することを目的とした新規技術です。基礎となるバレー-スピン分割は、スピン-軌道結合によって設定され、外部磁場の印加または近接結合によって調整することができます。 NbS_2 は、電荷密度波状態からは発生しない超伝導を示す遷移金属ダイカルコゲナイド(TMD)ファミリーの最も興味深い材料の一種です。遷移金属イオンと隣接する NbS_2 層間のファンデルワールスギャップにインターカレートすると、種々の非自明なスピントクスチャを誘導する長距離磁気秩序を実現出来る可能性があります。セントアンドリュース大学およびマンチェスター大学と共同で、Vインターカレート遷移金属ダイカルコゲナイド $\text{V}_{1/3}\text{NbS}_2$ の電子構造を研究しています。実験結果を再現する我々のシミュレーション計算により、 $\text{V}_{1/3}\text{NbS}_2$ の表面における遍歴電子への局所的磁気モーメント結合が、この材料におけるバレースピンの分裂を制御するための強力な道筋を提供出来ることを明らかにしました。[*Nature Materials* **22** (2023) 459–465]

2D状態の探索は、その特性が最先端のデバイスアプリケーションにとって望ましく不可欠であるため、物性物理および材料研究で非常に多用されるようになりました。2次元電子ガス(2DEG)は非常に高いキャリア移動度を有し、基本的な物性現象の観察も可能としており、 Eu_xTaO_3 では、フラクショナルペロブスカイトによって誘起される正方晶場(TCF)により、低エネルギーキャリアが準2Dであることが示されました。

これらのキャリアは、近接効果を介して外部磁場によって間接的に制御されるトポロジカルに非自明なスピントクスチャを持っています。この事実から、このシステムは最先端スピントロニクスデバイスでのアプリケーション向けの準2DEGを実現するための理想的なプラットフォームになります。また、この準2D挙動が発散的なShubnikov-de Haas(SdH)振動と振動ゼーベック効果に関係することも示されました。これらは2つとも本材料構造の優れた実験的特徴です。[*Adv. Funct. Mater.* **33** (2023) 2300995]フェルミオロジーは、超伝導系におけるバンド構造の電子配置とフェルミ面の形状を説明します。すなわち、微視的な電子対形成メカニズムを決定し、エキゾチックな量子現象を生成する上で重要な役割を果たします。実験家との共同研究により、 $\text{As}_x\text{P}_{1-x}$ において、コヒーレンス長変調を用いた3次元から2次元への超伝導の次元クロスオーバーを実現するためのフェルミロジー工学戦略を実証しました。超伝導の最大 T_c を示す圧力で、正孔から電子への圧力誘起キャリア型遷移があり、加圧によるバンド構造進化とそれに対応するフェルミオロジー変調を示唆しています。我々の密度汎関数理論計算によれば、 $\text{As}_x\text{P}_{1-x}$ はフォノン媒介電子対によって形成されたBardeen-Cooper-Schrieffer(BCS)超伝導体であるため、 x の変化に伴って最大 T_c が減少する根本的なメカニズムは、立方晶リン格子にドーピングされた重いヒ素元素とともに $\text{As}_x\text{P}_{1-x}$ のフォノンエネルギーが減少する超伝導のよく知られた同位体効果と類似しています。[*Science Advances* **9** (2023) eadf6758]

今後の研究予定には、実験グループや理論グループとの国際共同研究が含まれます。ナノ材料の電子特性を理解することにより、対象とする新規材料の複雑な構造と物性の関係を説明するための原子レベルの理解が得られます。以上の方策により、先端エネルギー応用のための新材料の実験的探索を支援することが可能となります。

室温近傍で作動する水素貯蔵材料の開発

佐藤 豊人 准教授
蓄エネルギー変換材料研究ユニット
水素機能材料工学研究部門

水素社会の構築には、水素を高密度、かつ安全に貯蔵する技術の確立が不可欠です。私は、水素を原子として貯蔵する材料(水素貯蔵材料)に関する研究を遂行しています。

水素は、多くの元素、又は材料と反応して、水素を原子レベルで含有する水素化物を形成します。このような反応を示す材料の中でも、周期表の1-5族元素Aと6-12族元素Bで構成される金属間化合物 AB_x は(x : 主に $1 \leq x \leq 5$)、元素Aと元素Bで構成される格子内に水素を原子として貯蔵し、水素ガスとして放出するため水素貯蔵材料としての利用が期待されています。水素の貯蔵方法は、水素ガス(水素分子)を700気圧(70 MPa)の高圧下で貯蔵する高圧貯蔵や極低温下で液化して貯蔵する液化貯蔵も挙げられますが、水素を原子として貯蔵する水素貯蔵材料は、水素分子間の反発を回避できるため、高圧貯蔵や液化貯蔵よりもコンパクトな水素貯蔵が実現されます(高い体積水素密度)。また、水素貯蔵材料は、100気圧(10 MPa)以下で水素を吸蔵・放出することから高圧貯蔵や液化貯蔵よりも安全な水素貯蔵方法として期待されています。一方、水素貯蔵材料は、全重量当たりの低い水素貯蔵量(低い重量水素密度)、適度な温度領域での作動、既存の水素貯蔵材料に代わる新たな材料開発が課題となっています。

水素貯蔵材料は、水素を原子として貯蔵することから原子レベルでの水素吸蔵・放出反応の理解が課題解決に繋がります。そのため、水素の検出に有効な中性子散乱の利用が不可欠です。私は、室温近傍で作動する新たな水素貯蔵材料の開発を目指して、中性子散乱を利用し、水素貯蔵材料中の水素の位置や水素と金属の化学結合の観点での水素吸蔵・放出反応の機構解明、軽元素を含有する材料開発、及び新規水素化物の探索研究を遂行しています。

中でも金属間化合物を構成する元素の一部を軽元素のマグネシウムや遷移金属に置換することで室温近傍で可逆的な水素吸蔵・放出反応を示し、その反応圧力を制御するとともに中性子散乱を利用して原子配列、及び金属と水素の化学結合の観点で水素吸蔵・放出反応機構を解明しました(T. Sato et al., J. Phys. Chem. C, 2022)。

水素貯蔵材料の研究分野では、一般的に100気圧(10 MPa)以下で水素貯蔵特性が評価されます。一方、水素は、1万気圧(1 GPa)以上で水素の化学ポテンシャルが急激に高まるため材料との反応が促進されます。私たちは、このような高圧領域での水素との反応にも着目して、実用化されている室温作動の水素貯蔵材料($LaNi_5$)の水素貯蔵量を評価しました。その結果、これまで知られている水素貯蔵量よりも1.5倍もの水素が吸蔵されることを明らかにし(図1)、新たな水素化物相も発見しました(T. Sato et al., Molecules, 2023)。

今後は、水素社会の構築に貢献できる室温近傍で作動する水素貯蔵材料の開発を目指した材料合成、低圧領域から高圧領域までの水素貯蔵材料評価、X線や中性子を活用した水素貯蔵反応機構の解明に関する研究を遂行したいと考えています。

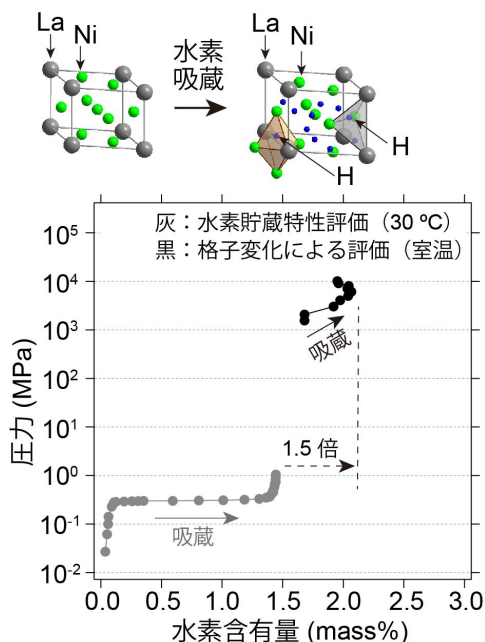


図: $LaNi_5$ の水素吸蔵反応、及びその結晶構造の変化

灰: 30 °Cにおける水素貯蔵特性評価で得られた結果、黒: 室温、1 GPa以上での高圧下での格子変化から得られた結果を示す(T. Sato et al., Molecules, 2023)。

E-IMR Summer Meeting 2024

開催日：2024年6月17日(月) 15:30ー17:30

開催場所:東北大学金属材料研究所 講堂

2024年6月17日(月)に金属材料研究所講堂においてE-IMR Summer Meeting 2024 を開催しました。このイベントは、本センターで実施されている研究活動をご紹介しますとともに、研究者による講演と今後のセンター活動の意見交換を目的としております。研究発表の部では、前田健作助教、伊藤啓太助教、野澤純特任助教、李弘毅特任助教、宋瑞瑞特任助教、よる研究活動紹介を行いました。

時間	コンテンツ・講演者
15:30 - 15:35	開会あいさつ 市坪 哲 [E-IMRセンター長/東北大学金属材料研究所教授]
【研究発表】	
15:35 - 15:55	非強誘電体の双晶形成を利用したバルク周期分極反転構造の作製 前田 健作 [太陽エネルギー変換材料研究ユニット/金属材料研究所助教]
15:55 - 16:15	模型熱電変換素子用の強磁性体材料の開発 伊藤 啓太 [太陽エネルギー変換材料研究ユニット/金属材料研究所助教]
16:15 - 16:35	コロイド結晶におけるヘテロエピタキシャル成長メカニズムの研究：新規エネルギー変換材料の開発に向けて 野澤 純 [太陽エネルギー変換材料研究ユニット/金属材料研究所特任助教]
【休憩・10分】	
16:45 - 17:05	アルカリイオン添加を用いたマグネシウムイオンの固体内拡散促進 李 弘毅 [蓄エネルギー変換材料研究ユニット/金属材料研究所特任助教]
17:05 - 17:25	Spinodal Decomposition and Phase Transformation during Fabricating Nanoporous Fe ₂ Mo ₆ Intermetallic Compounds by Liquid Metal Dealloying 宋 瑞瑞 [複合モジュール・社会実装研究ユニット/金属材料研究所特任助教]
17:25 - 17:30	開会あいさつ 市坪 哲 [E-IMRセンター長/東北大学金属材料研究所教授]

『2023年度若手研究者のための革新的エネルギー材料・複合モジュール創製研究助成』の採択課題

先端エネルギー材料理工共創研究センターでは、東北大学内の若手研究チームを対象として、脱炭素社会の実現(2050カーボンニュートラルの達成等)に貢献することを目指す材料科学およびその関連分野の萌芽的研究を支援するため、『若手研究者のための革新的エネルギー材料・複合モジュール創製研究助成』制度を設けています。2024年度は、古川 翔一特任助教(材料科学高等研究所)芳野 遼助教(金属材料研究所)岡本 啓助教(金属材料研究所)「室温近傍での水素分子吸着を実現する骨格構造・担持金属に着目した高分子材料の探索」

石黒 志准教授(国際放射光イノベーション・スマート研究センター)河口 智也助教(金属材料研究所)阿部 真樹学振特研究員(PD)(国際放射光イノベーション・スマート研究センター)「X線タイコグラフィー走査型転換電子収量同時イメージングによる表面/バルク両敏感ナノマルチモーダル可視化計測技術の開発」芳野 遼助教(金属材料研究所)岡 弘樹講師(多元物質科学研究所)豊田 良順助教(理科学研究科)「多孔性構造と触媒活性サイトを有する無機-有機ハイブリッド型錯体ゲルを用いた二酸化炭素変換反応の開拓」の3課題を採択しました。

ご案内

毎年12月に開催しているE-IMRワークショップですが、今年度は、11月に国際ワークショップとして、外国人研究者の先生をお招きして開催いたします。講演内容の詳細については、E-IMRのホームページでお知らせいたします、ぜひご参加ください。

【開催日】2024年11月26日(火)

【開催場所】東北大学金属材料研究所講堂 ※オンライン配信を予定